3.2 1차원 상자 (1-dimensional box)

이 절에서 우리는 자유입자의 해가 1차원 일부 영역에 국한된 “1차원 상자” 속에 갇혀 있는 입자의 슈뢰딩거 방정식 해에 대해 생각해 보기로 하겠다. 여기서 “1차원 상자”란 그 영역 밖에서는 무한대의 위치에너지 때문에 입자가 존재할 수 없음을 뜻하며 이는 마치 입자가 상자 안에 갇혀 있는 것과 같기 때문에 붙여진 명칭이다. 상자 내부 영역이 $0 < x < a$ 경우 그 하밀토니안은 다음과 같이 쓸 수 있다:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)\,, \quad V(x) = \begin{cases} 0\,, & \text{for} \quad 0 < x < a \\ \infty\,, & \text{for} \quad x \leqq 0,\, x \geqq a \end{cases}$$

상자 밖에서는 무한대의 위치에너지 때문에 입자가 존재할 수 없으므로 상자 벽에서 파동함수는 영이 되어야 한다. 즉 파동함수의 경계조건은 다음과 같이 주어진다.

$$\psi(x=0) = 0, \qquad \psi(x=a) = 0 \ .$$

파동함수가 상자 안에서만 존재하므로, 우리는 상자 안에서의 슈뢰딩거 방정식을 풀면 된다. 상자 안에서의 위치에너지는 0 이므로 슈뢰딩거 방정식은 자유입자의 경우와 같다.

즉, $\dfrac{p^2}{2m}\psi = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$.

우리는 이 방정식의 해가 $k^2 \equiv \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ 로 놓았을 때, $\psi(x) \sim \exp(\pm ikx)$ 로 주어짐을 안다.

자유입자의 경우와 달리 파동함수가 유한한 영역에 국한되고, $x=0$ 과 $x=a$ 에서 파동함수가 영이 되어야 하므로, 우리는 파동함수를 위에 주어진 해의 일반적인 1차 결합을 통하여 다음과 같이 sine 과 cosine 함수로 표현하기로 하겠다.

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

여기서 A 와 B 는 경계조건과 규격화 조건에 의하여 결정되어야 할 상수이다.

먼저 경계조건을 적용하면, $\psi(0) = 0 = A \cdot 0 + B \cdot 1$ 에서 $B = 0$ 이 되어야 한다.

그리고 $\psi(a) = 0 = A\sin ka$ 에서 $ka = n\pi$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$이 되어야 한다.

즉, $\psi_n(x) = A\sin\dfrac{n\pi x}{a}\,, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$.

여기서 $n=0$ 을 포함하지 않은 이유는 이 경우는 파동함수가 항상 영이 되기 때문에 입자가 존재하지 않음을 의미하게 되어 입자가 상자 내에 존재한다는 가정과 상치하게 되기 때문이다. 그리고 n 이 음수인 경우도 생각할 수 있으나 이는 단순히 파동함수에 -1 을 곱한 것에 불과하여 동일한 결과를 주기 때문이다.

이제 다음과 같이 파동함수의 규격화 조건을 요구하면,

$$<\psi_n \mid \psi_n> \; = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi_n^*(x)\,\psi_n(x) \;=\; |A|^2 \int_0^a dx\,\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 1 \ ,$$

$A = \sqrt{\dfrac{2}{a}}$ 가 되어야 하므로, 1차원 상자에서의 고유함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right),\ n = 1, 2, 3, \cdots \ .$$

위에서 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ 로 주어졌으므로, 각 고유함수에 해당하는 고유에너지는 다음과 같다.

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\ ,\ n = 1, 2, 3, \cdots\ .$$

여기서 $m \neq n$ 인 경우,

$$< \psi_m \mid \psi_n > \ = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_m{}^*(x)\, \psi_n(x)\ = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin(\frac{m\pi x}{a}) \sin(\frac{n\pi x}{a}) = 0$$

이 되므로, 우리는 고유함수들 사이에서 직교조건이 만족됨을 알 수 있다:

$$< \psi_m \mid \psi_n > \ = \delta_{m\,n}\ .$$

여기서, 우리가 주목할 점은 $0 < x < a$ 사이의 영역에 존재하는 임의의 함수를 위에서 구한 고유함수들로 전개할 수 있다는 점이다. 그러므로 우리는 1차원 상자 내에 존재하는 임의의 파동함수를 위에서 구한 고유함수들로 전개 가능하다:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin(\frac{n\pi x}{a})\ ,\quad 0 < x < a\ \ .$$

전개계수 a_n 은 고유함수들의 직교조건을 써서 다음과 같이 구할 수 있다:

$$< \psi_n \mid \Psi > \ = \sum_{m=1}^{\infty} < \psi_n \mid a_m \psi_m > \ = \sum_{m=1}^{\infty} a_m < \psi_n \mid \psi_m > \ = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \delta_{n\,m} = a_n\ .$$

그리고 규격화 조건은 다시 직교조건을 적용하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$< \Psi \mid \Psi > \ = 1 = \sum_{n,\,m=1}^{\infty} < a_n \psi_n \mid a_m \psi_m > \ = \sum_{n,\,m=1}^{\infty} a_n{}^* a_m < \psi_n \mid \psi_m > \ = \sum_{n=1}^{\infty} \mid a_n \mid^2$$

여기서 전개계수 a_n 의 절대값의 제곱의 전체 합은 1이 되는데, 이는 입자가 어떻게든 존재하여야 할 확률 1과 같다. 그러므로 우리는 이제 전개계수 a_n 의 절대값의 제곱($\mid a_n \mid^2$)을 주어진 상태 Ψ 에서 고유상태 ψ_n 가 존재할 확률로 해석할 수 있다.
